

$$\hat{H}_n = J_3 \left[\hat{S}_{n_1} \left(\frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_2} \left(\frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_2} \left(\frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_3} \left(\frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_3} \left(\frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_4} \left(\frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_4} \left(\frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_1} \left(\frac{1}{2} \right) \right] + J_2 \left[\hat{S}_{n_1} (1) \hat{S}_{n_3} (1) + \hat{S}_{n_2} (1) \hat{S}_{n_4} (1) \right], \quad (1)$$

$$\hat{H}_{n,n+1} = J_1 \left[\hat{S}_{n_1} (1) \hat{S}_{n+1_1} \left(\frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_2} \left(\frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n+1_2} (1) + \hat{S}_{n_3} (1) \hat{S}_{n+1_3} \left(\frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_4} \left(\frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n+1_4} (1) \right]. \quad (2)$$

Сперва мы рассчитали энергетический спектр одного блока. Затем, используя метод матричных произведений [3], нашли основное состояние спиновой трубки. Было установлено, что в результате увеличения фрустрирующего взаимодействия происходит смена основного состояния как одного блока, так и всей трубки. Качественно результаты метода матричных произведений согласуются с данными по прямой диагонализации [4].

Возбужденное состояние мы рассмотрели как основное с возмущением \tilde{g} , введённым в n -ый узел. Была построена пробная волновая функция для оптического магнана с моментом k и получено выражение для энергии, основной вклад в которую вносит энергия основного состояния.

Дальнейший интерес исследования представляет точка, в которой происходит смена основного состояния и роль фрустрирующего взаимодействия, определяющего поведение щели. Также нас заинтересовало то, как можно учесть симметрию трубки в данных расчётах для сокращения объема вычислений

Список публикаций:

[1] Goto T., Mushnikov N. V., Hosokoshi Y. et al. // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. 2003. Vol. 329. P. 1160 -1161.

[2] A.S.Ovchinnikov, V.E.Sinitsyn, I.G.Bostrem et al // *J. Phys.: Condensed Matter*. 2012. 24. 306003 .

[3] A.K.Kolezhuk, H.J.Mikeska, Yamamoto Shoji // *Phys. Rev. B*. 1997. 55. R3336 .

[4] В.Е.Синицын // *Расчет выполнен методом прямой диагонализации с использованием программы ALPS*

Нелинейные нормальные моды в углеродных цепочках

Усольцев Олег Андреевич

Сизинцев Дмитрий Андреевич

Южный федеральный университет

Чечин Георгий Михайлович

oleg-usol@yandex.ru

В данной работе исследуются нелинейные атомные колебания в карбине, представляющем собой моноатомную углеродную цепочку. Этот материал может существовать в двух различных модификациях – кумулен, с двойными химическими связями между атомами углерода, и полиин, с чередованием одинарных и тройных связей. С помощью первопринципных расчетов на основе теории функционала плотности нами было обнаружено смягчение продольной π -моды в некотором диапазоне ее амплитуд в цепочках кумулена, подвергнутых однородному растяжению выше 11% [1]. Это явление удалось объяснить потерей устойчивости старых атомных положений равновесия, относительно которых происходят колебания в цепочках кумулена при малых растяжениях, и возникновением в окрестности каждого из них двух новых положений равновесия относительно которых происходят колебания с мягким типом нелинейности (рис.1). Проблема устойчивости этих новых положений равновесия обсуждалась нами в работе [2].

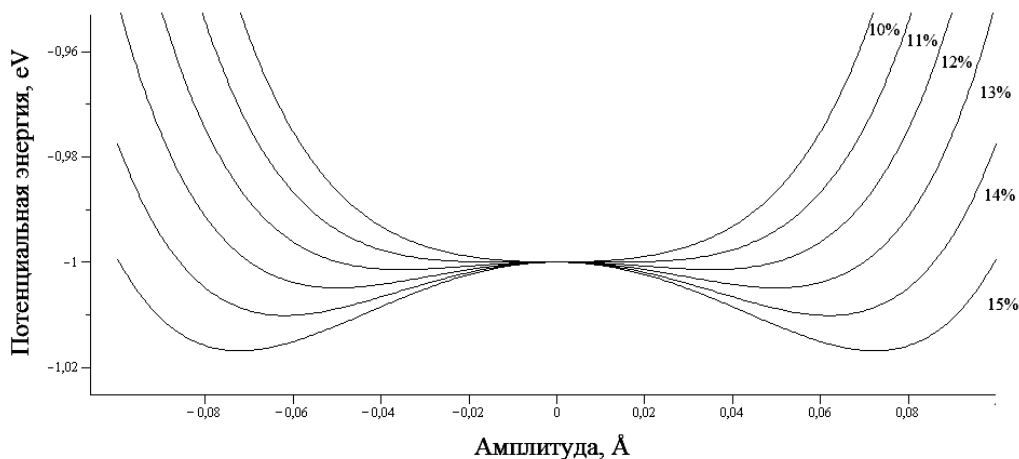


рис.1 Зависимость потенциальной энергии цепочки с потенциалом Леннарда-Джонса при различных ее растяжениях от амплитуды π -моды.

Конденсация мягкой π -моды приводит к фазовому переходу Пайерлса. Как показано в работе [3], в результате такого перехода в электронном спектре кумулена появляется щель, и он переходит из проводящего состояния в состояние полупроводника или изолятора. Это явление открывает теоретическую возможность влиять на электронные свойства рассматриваемого материала посредством простого механического воздействия, что, в свою очередь, может быть использовано при создании новых нанотехнологических устройств.

С другой стороны, теоретико-групповое исследование [4] показывает, что в монокристаллических цепочках с произвольным законом взаимодействия кроме π -моды могут существовать еще две симметрично-обусловленные нелинейные нормальные моды Розенберга, которым соответствуют однопараметрические периодические динамические режимы. Если π -мода связана с удвоением примитивной ячейки цепочки в ее колебательном состоянии, то двум другим модам Розенберга отвечает утроение и учетверение такой ячейки.

В настоящей работе исследовалась возможность смягчения двух последних мод в цепочках кумулена и возникновение фазовых переходов, обусловленных их конденсацией. Оказывается, что большинство статических и динамических свойств углеродных цепочек, подвергнутых однородному растяжению, можно объяснить в рамках простой классической модели цепочек с парными потенциалами межатомного взаимодействия, в частности, с потенциалом Леннарда-Джонса. Детальное изложение представленных в настоящей работе результатов приведено в работе [5].

Список публикаций:

- [1] Chechin G.M., Sizintsev D.A., Usoltsev O.A. // *Letters on materials*. 2016. vol. 6(2). 146.
- [2] Chechin G.M., Sizintsev D.A., Usoltsev O.A. // *Letters on materials*. 2016. vol. 6(4). 309.
- [3] Artyukhov V.I., Liu M., Yakobson B.I. // *Nano Letters*. 2014. vol. 14. 4224.
- [4] Chechin G.M., Ryabov D.S., Zhukov K.G. // *Physica D*. 2005. vol. 203. 121.
- [5] Chechin G.M., Sizintsev D.A., Usoltsev O.A. // *arXiv:1701.0454*. 2017.

Дифференцирование по компонентам волнового вектора в расчетах электронной структуры кристаллов

Филиппов Даниил Игоревич

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.

filippovdaniil@gmail.com

При решении ряда задач физики твердого тела, актуальной и в наше время остается задача расчета точных производных по компонентам волнового вектора \mathbf{k} [1]. И это несмотря на то, что данная проблема уже рассматривается достаточно долго, в частности, в работах [2,3]. Основная сложность таких расчетов заключается в том, что рассматриваемая зависимость обычно является неявной, т.к. дифференцируемая величина является результатом предшествующих вычислений для заданного значения волнового вектора.

Целью данной работы была разработка метода расчета аналитических производных $E_{n\vec{k}}^{k_\alpha, k_\beta}$ полной энергии, полученной в рамках теории функционала плотности с использованием базиса численных псевдоатомных орбиталей (ПАО) [4]. Вследствие того, что данный базис является неортогональным и неполным, выражение для производных, которое следует из теоремы Геллмана-Фейнмана, становится неприменимым. Для достижения поставленной цели были получены соответствующие расчетные формулы и получены значения эффективных масс электронов для ряда соединений по известному соотношению

$$m_{\alpha\beta}^* = \left(E_{n\vec{k}}^{k_\alpha, k_\beta} \right)^{-1}, \quad (1)$$

которые сравнивались с результатами работ других авторов и доступными экспериментальными значениями.

Кристаллическая волновая функция в базисе ПАО имеет следующий вид:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\mu\alpha} C_{\mu\alpha}(\vec{k}) \Phi_{\mu\alpha}(\vec{k}, \vec{r}), \quad \Phi_{\mu\alpha}(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{k}(\vec{a} + \vec{t}_\alpha)} \varphi_{\mu\alpha}(\vec{r} - \vec{a} - \vec{t}_\alpha). \quad (2)$$

Первые производные можно получить путем прямого дифференцирования основного уравнения зонной теории

$$\hat{H} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3)$$